

Equazione di Schrödinger

1. Nascita e formalismo della Meccanica Quantistica

Nella prima metà del secolo scorso si è attuata in Fisica una profonda rivoluzione concettuale motivata dall'esigenza di spiegare i nuovi fenomeni subatomici. Tale rivoluzione, di immensa portata filosofica, ha portato alla creazione di una nuova meccanica, detta Meccanica Quantistica, che ha rimpiazzato la Meccanica Newtoniana, rivelatasi inadeguata per descrivere il comportamento delle particelle subatomiche.

Chiariamo subito che ciò non significa che la Meccanica Classica sia falsa. Semplicemente vogliamo dire che il modello matematico che descrive la Fisica macroscopica con grande successo, cioè la Meccanica tradizionale basata sulle leggi di Newton, ha un dominio di applicabilità limitato al mondo macroscopico e che, per studiare fenomeni microscopici, talvolta occorre ricorrere a uno schema concettuale più sofisticato, fornitoci appunto dalla Meccanica Quantistica. Tale formalismo è riuscito fino ad ora a spiegare gli esperimenti con successo. L'unità concettuale di approccio alla realtà fenomenica, non è tuttavia persa: la Meccanica Classica si può infatti riottenere dalla Meccanica Quantistica in una situazione limite. In altre parole essa costituisce un modello ridotto peraltro più utile e duttile nel descrivere i fenomeni macroscopici - incredibilmente interessante da un punto di vista fisico-matematico da costituire un'interessante branca della ricerca matematica contemporanea- deducibile dal modello matematico della Meccanica Quantistica in una qualche approssimazione.

Naturalmente è concepibile che le necessità procurate dalla Fisica sperimentale possano un giorno motivare la ricerca e la scoperta di una nuova Meccanica di cui la Meccanica Quantistica sia solo una sua approssimazione.

Tornando alle motivazioni che hanno portato alla formulazione di una nuova Meccanica, elenchiamo alcuni fatti sperimentali tra i molti che hanno contribuito allo sviluppo delle nuove idee. Il lettore che ne voglia sapere di piú é indirizzato ai testi citati nella premessa.

1. Il corpo nero

Il corpo nero é una cavità a temperatura costante. Le pareti interne di questa cavità emettono e assorbono radiazioni elettromagnetiche. Se si osserva lo spettro di irraggiamento di questa cavità, cioè se si valuta la quantità di energia emessa dalla radiazione che esce da una piccola apertura del corpo nero, in funzione della frequenza di radiazione, si trova una profonda inconsistenza sul comportamento ad alte frequenze, tra i dati sperimentali (legge di Wien) e le previsioni dell'elettrodinamica classica (legge di Reyleigh-Jeans). Tale inconsistenza si supera se, seguendo Planck, si ipotizza che l'energia relativa ad una frequenza ν possa essere emessa solo per multipli interi della frequenza stessa per una costante, dalle dimensioni di un'azione, detta costante di Planck e universalmente denotata col simbolo h :

$$E = nh\nu. \quad (1.1)$$

Tale costante (molto piccola rispetto alle azioni tipiche che compaiono nei fenomeni meccanici usuali) fu in effetti calcolata da Planck al fine di spiegare lo spettro del corpo nero in accordo all'ipotesi (1.1).

2. Il modello atomico di Bohr.

La teoria classica dell'elettrone non poteva spiegare la stabilità del modello atomico (di tipo planetario) di Ruthrford. Una particella carica accelerata emette radiazioni elettromagnetiche perdendo così energia. La teoria classica prevede dunque una rapida caduta dell'elettrone sul nucleo. Inoltre gli atomi emettono solo radiazioni elettromagnetiche di frequenze opportune. Perché ?

Bohr assunse che l'elettrone potesse avere solo valori opportuni di energia. Che la frequenza di emissione della radiazione fosse dovuta a salti che l'elettrone compie nel passaggio da uno stato di energia E_1 ad uno stato di energia $E_2 < E_1$ e che tale frequenza fosse esprimibile dalla formula:

$$h\nu = E_1 - E_2.$$

Inoltre ipotizzò che le energie permesse all'elettrone fossero del tipo:

$$E_n = -\frac{1}{2}h\nu_e$$

dove ν_e è la frequenza di rivoluzione dell'elettrone.

Si noti che queste ipotesi, puramente fenomenologiche (cioè non fanno riferimento ad uno schema concettuale preesistente), e in contrasto con la Meccanica Classica, sono in linea con le ipotesi di Planck per spiegare il comportamento del corpo nero e descrivevano correttamente gli spettri di emissione degli atomi.

3. Effetto fotoelettrico.

Una radiazione luminosa colpisce una piastra metallica e da essa fuoriescono elettroni. Si osserva che l'energia degli elettroni emessi non dipende dall'intensità del raggio luminoso ma solo dalla sua frequenza in accordo alla formula:

$$E = h\nu - L$$

dove E è l'energia dell'elettrone, ν la frequenza della radiazione e L è il lavoro necessario per estrarre un elettrone dal metallo conduttore. Incidentalmente questo è il principio con cui lavorano le moderne cellule fotoelettriche.

Una spiegazione di tale fenomeno è che la luce sia costituita da particelle (fotoni) la cui energia è un quanto pari a $h\nu$. Dunque la luce sembrava possedere una doppia natura di onda e sistema di particelle.

4. Diffrazione degli elettroni

D'altra parte anche oggetti fino allora considerati come particelle, sembravano avere una natura ondulatoria. Un fascio di elettroni emesso da una sorgente incontra una parete con due fenditure. Uno schermo posto al di là delle fenditure rivela delle frange d'interferenza dello stesso tipo di quelle osservate per la luce e spiegabili in termini di propagazione ondosa.

In conclusione, se la radiazione ha anche un comportamento particellare, le particelle hanno anche un comportamento ondulatorio.

Ovviamente la descrizione sintetica di qualche evento sperimentale non dà neanche una pallida idea dello sforzo profuso, negli anni venti e trenta,

dai fisici teorici che hanno contribuito alla creazione della struttura matematica e concettuale della Meccanica Quantistica che costituisce l'oggetto di queste note. Il lettore che dovesse accostarsi per la prima volta a questo argomento, potrebbe rimanere filosoficamente disorientato dal nuovo formalismo, al di là della sua preparazione matematica. Voglio riportare, a questo proposito, un brano dell'introduzione al suo libro "I Principi della Meccanica Quantistica" del celebre fisico inglese P.A.M. Dirac.

Le nuove teoriesono costruite a partire da concetti fisici che non possono essere spiegate in termini di oggetti già noti allo studente, e che anzi non possono essere spiegati adeguatamente a parole. Come i concetti fondamentali (ad esempio di prossimità e di identità) che si devono acquisire venendo al mondo, i nuovi concetti della Fisica possono essere acquisiti solo attraverso una lunga familiarità con le loro proprietà e i loro usi.

Prima di discutere i postulati che hanno portato alla formazione del modello matematico della Meccanica Ondulatoria (o, più in generale, della Meccanica Quantistica) rivediamo alcuni aspetti della meccanica delle onde (che si applica ad esempio alla propagazione della luce) che costituiscono una base indispensabile per la nostra futura analisi.

E' noto dalle equazioni di Maxwell che il campo elettrico e magnetico si propagano, nel vuoto, in accordo all'equazione delle onde:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi = c^2\Delta\phi, \quad (1.2)$$

dove ϕ è una quantità scalare, ad esempio una componente del campo elettrico o magnetico. L'intensità associata al campo ϕ nel volume dx , è data dall'espressione:

$$I(x)dx = |\phi(x)|^2dx.$$

Una soluzione dell'equazione (1.2) è data da:

$$\phi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \hat{\phi}_0(k) e^{i(k \cdot x - \omega t)} dk \quad (1.3)$$

purché

$$\omega^2 = c^2|k|^2. \quad (1.4)$$

La (1.4) viene detta relazione di dispersione.

Si noti che la (1.3) é la decomposizione in frequenze della soluzione dell'equazione delle onde, o ciò che é lo stesso, il suo sviluppo in Fourier. Infatti

$$\hat{\phi}_0(k)e^{-i\omega t}$$

é la trasformata di Fourier della soluzione (1.3).

La soluzione (1.3) si dice pacchetto d'onde perché é, per ogni t , una sovrapposizione di onde piane $e^{ik \cdot x}$ (pesate con il fattore $\hat{\phi}_0(k)e^{-i\omega t}$). All'oscillazione in x di pulsazione k (che viene detto numero d'onda), si combina anche un'oscillazione in t di pulsazione ω . k e ω sono legati dalla relazione di dispersione (1.4).

Si osservi che la relazione di dispersione é conseguenza dell'equazione. Ad esempio, affinché l'equazione

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi = c^2\Delta\phi + \beta\phi$$

ammetta la soluzione (1.3), deve essere:

$$\omega(k) = \pm\sqrt{c^2k^2 + \beta}.$$

Vediamo ora alcune proprietà generali della soluzione ondosa (1.3) nel caso di una relazione di dispersione generale $\omega = \omega(k)$. Si noti che in questa fase, non stiamo assumendo che ϕ sia soluzione di alcuna equazione, ma che abbia la forma (1.3) con qualche relazione di dispersione $\omega = \omega(k)$.

Si definisce innanzi tutto, in maniera del tutto naturale, il centro del pacchetto d'onde come:

$$\langle X(t) \rangle = \left(\int |\phi(x, t)|^2 dx \right)^{-1} \int x |\phi(x, t)|^2 dx. \quad (1.5)$$

E' facile verificare che $\int |\phi(x, t)|^2 dx$ é costante nel tempo. Ammetteremo per semplicità che tale costante sia 1.

Inoltre

$$v_g := \frac{d}{dt}\langle X(t) \rangle = \int V(k) |\hat{\phi}_0(k)|^2 dk \quad (1.6)$$

dove $V(k) = \nabla_k \omega(k)$. La quantità v_g si chiama velocità di gruppo del pacchetto, mentre $V(k)$ si dice velocità relativa al numero d'onda k .

Per dimostrare la (1.6) ci si basa su un'utile rappresentazione di $\langle X(t) \rangle$. Si ha:

$$\langle X(t) \rangle = (\phi(t), x\phi(t)) = (\hat{\phi}(t), \mathcal{F}(x\phi(t))) \quad (1.7)$$

D'altra parte:

$$\begin{aligned}
x\phi(x, t) &= -i \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \hat{\phi}_0(k) e^{-i\omega(k)t} \nabla_k e^{ik \cdot x} dk \\
&= i \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \nabla_k \hat{\phi}_0(k) e^{-i(\omega(k)t - k \cdot x)} dk \\
&\quad + t \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \nabla_k \omega(k) \hat{\phi}_0(k) e^{-i(\omega(k)t - k \cdot x)} dk
\end{aligned} \tag{1.8}$$

da cui:

$$\mathcal{F}(x\phi(t))(k) = i \nabla_k \hat{\phi}_0(k) e^{-i\omega(k)t} + t \nabla_k \omega(k) \hat{\phi}_0(k) e^{-i\omega(k)t}. \tag{1.9}$$

Infine:

$$\langle X(t) \rangle = i \int \overline{\hat{\phi}_0} \nabla_k \hat{\phi}_0 dk + t \int \nabla_k \omega(k) |\hat{\phi}_0(k)|^2 dk. \tag{1.10}$$

La (1.6) segue dunque dalla (1.10).

L'analisi cinematica del moto ondoso fin qui svolta si basa su una legge di dispersione $\omega = \omega(k)$ che, nel caso della Meccanica Quantistica, é per ora incognita. A questo proposito interviene il principio di corrispondenza stabilito da de Broglie sulla base della situazione sperimentale sommariamente esposta in 4 esperimenti descritti sopra. Tale principio stabilisce che una particella ha una doppia natura, corpuscolare e ondulatoria. Le grandezze ondulatorie sono date dalla frequenza $\nu = \frac{\omega}{2\pi}$ e dal vettore d'onda $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ dove λ é la lunghezza d'onda. Le grandezze corpuscolari corrispondenti sono l'energia $E = h\nu = \hbar\omega$ e l'impulso $p = \hbar k$. In accordo a quanto stabilito dal principio di corrispondenza, abbiamo la seguente la seguente legge di dispersione per una particella quantica di massa m che si muova in assenza di forze:

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \tag{1.11}$$

che é conseguenza del fatto che:

$$E = \hbar\omega = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{1.12}$$

Possiamo dunque ricavare l'equazione di evoluzione di tale particella nel nuovo formalismo ondulatorio ipotizzando che lo stato di tale particella sia

descritto da un'onda $\psi(x, t)$, del tipo (1.3), con la relazione di dispersione (1.11):

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \hat{\psi}_0(k) e^{i(k \cdot x - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} dk. \quad (1.13)$$

Come conseguenza della (1.13), tramite ispezione diretta, abbiamo che:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi. \quad (1.14)$$

L'equazione (1.8) é l'equazione di Schrödinger per una particella libera.

Passiamo ora ad analizzare il comportamento delle soluzioni $\psi(x, t)$ dell'equazione di Schrödinger libera. Sappiamo già che la quantità $\int |\psi(x, t)|^2 dx$ é una costante del moto:

$$\frac{d}{dt} \int |\psi(x, t)|^2 dx = 0.$$

Riotteniamo questo risultato utilizzando la (1.14). Si ha:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \|\psi(t)\|_{L_2} &= (\partial_t \psi(t), \psi(t)) + (\psi(t), \partial_t \psi(t)) = \\ &= i\hbar [(\Delta \psi(t), \psi(t)) - (\psi(t), \Delta \psi(t))] = 0. \end{aligned}$$

Il centro del pacchetto d'onda (o la media) definito da

$$\langle X(t) \rangle = \left(\int |\psi(x, t)|^2 dx \right)^{-1} \int x |\psi(x, t)|^2 dx \quad (1.15)$$

che si interpreta come la posizione media della particella nello stato $\psi(t)$, non dipende dalla normalizzazione $\int |\psi(x, t)|^2 dx$ che sarà assunta uguale a 1. E' naturale dunque interpretare la quantità:

$$\rho(x, t) dx = |\psi|^2(x, t) dx \quad (1.16)$$

come la probabilità di trovare la particella nel volume dx .

Inoltre, dalla (1.6) e (1.11):

$$\frac{d}{dt} \langle X(t) \rangle = v_g = \int |\hat{\psi}(k, t)|^2 \frac{\hbar k}{m} dk \quad (1.17)$$

dove la quantità a secondo membro della (1.17) si interpreta come velocità media. L'impulso medio avrà dunque la seguente espressione:

$$\langle P(t) \rangle = mv_g = \hbar \int |\hat{\psi}(k, t)|^2 k dk \quad (1.18)$$

$|\hat{\psi}(k, t)|^2$ si interpreta come la distribuzione di probabilità del parametro d'onda k e dunque dell'impulso che differisce da k per la costante $\hbar$. Infine si osservi che

$$\langle P(t) \rangle = -i\hbar \int dx \bar{\psi}(x, t) \nabla \psi(x, t) \quad (1.19)$$

La (1.19) porta a considerare l'impulso come un operatore lineare $P = -i\hbar \nabla$ che agisce sulle funzioni d'onda.

Possiamo sintetizzare quanto fin qui detto fissando una serie di primi postulati per la Meccanica Quantistica.

1. Stati fisici

Gli stati di un sistema fisico, in particolare di una particella in $\mathbb{R}^3$, sono descritti da funzioni d'onda che sono elementi di $L_2(\mathbb{R}^3)$. Se ψ_1 e ψ_2 sono due stati, anche una loro combinazione lineare $\alpha\psi_1 + \beta\psi_2$ é uno stato possibile per il sistema. Le funzioni reali e positive:

$$|\psi(x, t)|^2 \|\psi(t)\|_{L_2}^{-2}$$

e

$$|\hat{\psi}(k, t)|^2 \|\hat{\psi}(t)\|_{L_2}^{-2}$$

si interpretano come le distribuzioni di probabilità di posizione e impulso della particella.

Si noti che se gli stati ψ_1 e ψ_2 sono normalizzati ($\|\psi_1\|_{L_2} = \|\psi_2\|_{L_2} = 1$) non lo stesso accade per una loro combinazione lineare $\alpha\psi_1 + \beta\psi_2$ avendosi:

$$\|\alpha\psi_1 + \beta\psi_2\|_{L_2}^2 = \alpha^2 + \beta^2 + 2\mathcal{R}[\bar{\alpha}\beta(\psi_1, \psi_2)].$$

2. Osservabili

Le osservabili sono operatori lineari simmetrici su $L_2(\mathbb{R}^3)$. Se A é un operatore simmetrico, dalla condizione di simmetria abbiamo che la quantità $(\psi, A\psi)$, che é il valor medio dell'osservabile A nello stato ψ , é reale, come richiesto dalla fisica.

In particolare l'operatore posizione:

$$X\psi(x) = x\psi(x) \quad (1.20)$$

é la moltiplicazione per x . L'impulso é definito da:

$$P\psi(x) = -i\hbar\nabla\psi(x). \quad (1.21)$$

L'energia di una particella libera é l'operatore:

$$H = \frac{P^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad (1.22)$$

3. Evoluzione

L'evoluzione di una particella libera é data dall'equazione:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi. \quad (1.23)$$

Se la particella si muove sotto l'azione di un campo di forze conservativo generato da un potenziale $V = V(x)$, allora l'Hamiltoniana del sistema é data dall'espressione:

$$H = \frac{P^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x) \quad (1.24)$$

cioé il potenziale é dato dalla moltiplicazione per la funzione V . L'equazione di evoluzione é data allora da:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi. \quad (1.25)$$

L'equazione (1.25) é detta equazione di Schrödinger.

Si noti che l'equazione che abbiamo postulato per il moto di una particella sotto un campo di forze conservativo non é stata affatto giustificata. La sua specifica forma é giustificata solo dal successo che essa ha avuto nello spiegare i dati sperimentali. Inoltre essa é in accordo con la Meccanica Classica nel senso che la legge di Newton vale per i valori medi (vedi

Teorema di Ehrenfest nel prossimo paragrafo). Infine, come vedremo in seguito, la Meccanica Classica é ottenibile nel limite $\hbar \rightarrow 0$ dalla Meccanica Quantistica. Tale limite, detto limite classico, é simile al limite di alta frequenza che ci permette di ottenere l'ottica geometrica a partire dalla Meccanica dell' onde.

2. Prime conseguenze dei postulati

La prima conseguenza dei postulati appena introdotti ci conforta: l'evoluzione temporale dei valori medi soddisfa alle leggi della Meccanica Classica. Questo é il contenuto del Teorema di Ehrenfest che andiamo ad illustrare.

Si consideri una particella sotto l'azione di un campo di forze conservativo dato dal potenziale $V = V(x)$. La forza é dunque $F = -\nabla V$. Allora valgono le seguenti relazioni:

$$\frac{d}{dt}\langle X(t) \rangle = \frac{1}{m}\langle P(t) \rangle, \quad (2.1)$$

$$\frac{d}{dt}\langle P(t) \rangle = -\langle \nabla V(t) \rangle. \quad (2.2)$$

La (2.1) ci dice che la variazione temporale della posizione media é l'impulso medio. Mentre la (2.2) asserisce che la variazione dell'impulso medio é uguale alla forza media.

La (2.1) é già stata dimostrata. La ridimostriamo ora usando esplicitamente l'equazione di Schrödinger. Si ha:

$$\frac{d}{dt}\langle X(t) \rangle = (\partial_t \psi, X\psi) + (\psi, X\partial_t \psi) = \frac{i\hbar}{2m}(\psi, (\Delta X - X\Delta)\psi). \quad (2.3)$$

D'altra parte, denotando con X_i la moltiplicazione per x_i , e con $\partial_j = \frac{\partial}{\partial x_j}$, si ha:

$$\Delta X_i \psi = \sum_{j=1}^3 \partial_j^2 (x_i \psi) = \sum_{j=1}^3 (2\delta_{i,j} \partial_j \psi + x_i \partial_j^2 \psi)$$

da cui:

$$(X\Delta - \Delta X)\psi = 2\nabla\psi.$$

Tornando alla (2.3) si ha dunque:

$$\frac{d}{dt}\langle X(t) \rangle = (\psi, \frac{i\hbar}{m}\nabla\psi) = \frac{1}{m}\langle P(t) \rangle.$$

Inoltre:

$$\frac{d}{dt}\langle P(t) \rangle = (\partial_t \psi, P\psi) + (\psi, P\partial_t \psi) = -(\psi, \nabla(V\psi) - V\nabla\psi) = -\langle \nabla V(t) \rangle.$$

Un commento sul teorema di Ehrenfest. Esso é certamente interessante da un punto di vista concettuale ma non é particolarmente utile nella pratica, come sarebbe il caso se a secondo membro della (2.2) ci fosse $-\nabla V(\langle X(t) \rangle)$: per conoscere il moto del centro del pacchetto d'onda bisogna comunque risolvere l'equazione di Schrödinger.

Nella dimostrazione del Teorema di Ehrenfest abbiamo implicitamente usato l'importante proprietà seguente. Sia P_i la componente i -ma dell'impulso. A questa corrisponde l'operatore lineare:

$$P_i = -i\hbar\partial_i.$$

E' immediato verificare che:

$$X_i P_j - P_j X_i = i\hbar\delta_{i,j} \quad (2.4)$$

Le (2.4) vengono dette relazione canoniche di commutazione e, usualmente vengono usualmente scritte nella forma:

$$[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{i,j} \quad (2.5)$$

denotando con il simbolo:

$$[A, B] = AB - BA$$

il commutatore tra due osservabili.

Una delle caratteristiche nuove della Meccanica Quantistica é che le osservabili fisiche, essendo operatori lineari, non commutano tra loro. Questo crea dei problemi nella quantizzazione delle osservabili. Infatti, in Meccanica Classica, le osservabili sono funzioni definite sullo spazio delle fasi. Ora é chiaro che non abbiamo difficoltà a identificare le osservabili quantistiche corrispondenti nel caso che tali osservabili siano funzioni o della sola posizione o del solo impulso o una somma di esse. La regola generale é:

$$f(X)\psi = f(x)\psi \quad (2.6)$$

$$f(P)\psi(x) = f(-i\hbar\nabla)\psi(x). \quad (2.7)$$

La (2.6) non presenta problemi interpretativi: l'osservabile funzione della posizione é la moltiplicazione per la funzione stessa. Anche la (2.7) non presenta problemi interpretativi se f é un polinomio. Se f é una funzione

arbitraria possiamo passare alla trasformata di Fourier (denotata con $\mathcal{F}$). Allora il senso da dare alla (2.7) é:

$$(\mathcal{F}f(P)\psi)(k) = f(\hbar k)\hat{\psi}(k). \quad (2.8)$$

Dunque una funzione dell'impulso é una moltiplicazione per una funzione di $\hbar k$ nello spazio di Fourier. Quindi la (2.7) é una scrittura simbolica che ha il preciso senso della (2.8). Un operatore tipo (2.7) si chiama operatore pseudodifferenziale e f si chiama simbolo di tale operatore.

Fin qui non sorge alcun problema. Ma cosa accade se dobbiamo quantizzare osservabili tipo $f(x, p) = x^n p^k$? Poiché P e X non commutano, non é chiaro che senso dare a monomi di questo tipo. Lasciamo per il momento questa questione in sospeso perché in molti rilevanti problemi di Meccanica Quantistica non ci si pone la necessità di quantizzare osservabili che possano creare ambiguità.

Abbiamo piú volte detto che il valore medio di un'osservabile A , cioè un operatore simmetrico in $L_2(\mathbb{R}^3)$, nello stato ψ tale che $\|\psi\| = 1$, é dato dall'espressione $(\psi, A\psi) = \langle A \rangle$. Nel seguito denoteremo con $\|\cdot\|$ la norma L_2 per semplicità notazionale. Una grandezza che esprime quanto devia l'osservabile dal suo valor medio, é la quantità:

$$(\Delta A) = (\psi, (A - \langle A \rangle I)^2 \psi)^{1/2} = \|(A - \langle A \rangle I)\psi\| \quad (2.9)$$

detta scarto quadratico medio. Il seguente Teorema mette un limite inferiore al prodotto degli scarti quadratici medi per gli operatori impulso e posizione:

Teorema 1 (Principio di indeterminazione di Heisenberg)

$$\Delta X_i \Delta P_i \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.10)$$

Il principio di indeterminazione asserisce che impossibile costruire uno stato ψ in cui si possano misurare con precisione arbitraria impulso e posizione.

Il principio di indeterminazione é un corollario del seguente Teorema:

Teorema 2

Siano A e B due operatori simmetrici. Sia ψ tale che $\|\psi\| = 1$. Allora vale la disuguaglianza:

$$\|A\psi\|^2 \|B\psi\|^2 \geq \frac{1}{4} |(\psi, [A, B]\psi)|^2. \quad (2.11)$$

Dim. Dalla simmetria di A segue:

$$|(\psi, AB\psi)| \leq \|A\psi\| \|B\psi\| \quad (2.12)$$

e analogamente:

$$|(\psi, BA\psi)| \leq \|A\psi\| \|B\psi\|. \quad (2.13)$$

Dalla (2.12) e (2.13) segue facilmente la (2.11). ■

La dimostrazione di Teorema 1 segue da Teorema 2 ponendo:

$$A = X_i - \langle X_i \rangle I \quad (2.14)$$

$$B = P_i - \langle P_i \rangle I \quad (2.15)$$

da cui risulta:

$$[A, B] = [X_i, P_i] = i\hbar. \quad (2.16)$$

■

Sia ora H un'Hamiltoniana quantistica di una particella e siano E e ψ_E un autovalore e un autovettore (autostato) rispettivamente. Ciò significa che:

$$H\psi_E = E\psi_E \quad (2.17)$$

Dall'equazione di Schrödinger segue facilmente che la soluzione di tale equazione con dato iniziale ψ_E è semplicemente:

$$\psi(x, t) = e^{-i(E/\hbar)t} \psi_E(x) \quad (2.18)$$

e dunque la densità di probabilità della particella al tempo t è data da:

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = |\psi_E(x)|^2 \quad (2.19)$$

ed é costante nel tempo. Per questa ragione gli autostati di un'Hamiltoniana vengono anche detti stati stazionari. Inoltre, poiché $\int \rho(x)dx = 1$, la particella ha probabilità molto piccola di trovarsi molto lontana dall'origine e ciò uniformemente nel tempo.

Gli stati stazionari si dicono, per questo motivo, anche stati legati. Essi corrispondono a situazioni classiche in cui la particella compie orbite limitate.

E' naturale ipotizzare che se $H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$ con $V(x)$ che diverge per $|x| \rightarrow \infty$, (e dunque il sistema classico compie orbite periodiche) allora H ha una famiglia completa (base ortonormale) di autostati, corrispondenti alle orbite periodiche del sistema classico corrispondente, con valori ammessi dell'energia E quantizzati. Sotto opportune ipotesi ciò può essere provato, ma la dimostrazione é troppo tecnica per il livello di queste note.

Siano ora $\{E_i\}$ una famiglia di livelli di energia:

$$H\psi_i = E_i\psi_i \quad (2.20)$$

con $\|\psi_i\| = 1$. Dalla simmetria di H segue che $\psi_i \perp \psi_j$ se $E_i \neq E_j$. Se l'insieme $\{\psi_i\}$ costituisca una base completa allora ogni vettore ψ_0 sarebbe esprimibile come:

$$\psi_0 = \sum_i c_i \psi_i \quad (2.21)$$

dove $c_i = (\psi_i, \psi_0)$. In questo caso la soluzione dell'equazione di Schrödinger si scriverebbe facilmente come:

$$\sum_i c_i e^{-i(E_i/\hbar)t} \psi_i. \quad (2.22)$$

Naturalmente non sempre un sistema fisico ha un'Hamiltoniana che ammette un sistema completo di autofunzioni. Se le soluzioni non descrivono situazioni fisiche di stati legati, come ad esempio stati di diffusione (scattering), l'energia non é quantizzata ma assume un'infinitá continua di valori (spettro continuo). Vedremo in seguito un esempio.

Abbiamo visto che la densitá di probabilità $\rho(x)$ é globalmente conservata (conservazione della probabilità) per la dinamica indotta dall'equazione di Schrödinger. Tale fatto traspare da una legge di conservazione espressa dalla relazione:

$$\partial_t \rho(x, t) + \text{div} J = 0 \quad (2.23)$$

dove J é la corrente di probabilità (o corrente di massa) é data dall'espressione:

$$J = \frac{\hbar}{m} \mathcal{I}(\bar{\psi} \nabla \psi). \quad (2.24)$$

Lasciamo al lettore, per esercizio, derivare la (2.23).

Concludiamo con brevissimi cenni storici.

Il modello atomico di Bohr fu formulato nel 1913. Gli studi sul corpo nero e l'introduzione delle ipotesi di quantizzazione dei livelli energetici é dell'inizio del secolo. Lo sviluppo della Meccanica Ondulatoria, iniziato da Schrödinger, seguí il principio di corrispondenza di De Broglie formulato nel 1924. L'equazione di Schrödinger, che é la base della Meccanica Ondulatoria, fu presentata nel 1926. Comunemente si parla di Meccanica Ondulatoria per descrivere la Teoria Quantistica in termini di equazione di Schrödinger. Per la teoria classica della propagazione ondosa si usano altri nomi come Meccanica delle onde o simili.

In realtà nel 1925 Heisenberg aveva proposto un altro modo di formulare la Teoria Quantistica in termini di evoluzione temporale di matrici, i cui elementi rappresentano le quantità veramente rilevanti per il mondo subatomico: le probabilità di transizione dei vari livelli energetici. Immediatamente lo stesso Schrödinger dimostró nel 1926 che tale teoria era equivalente alla sua Meccanica Ondulatoria.

Nel 1930 Dirac propose un formalismo generale della Meccanica Quantistica, che fu poi reso rigoroso, nel 1936, da Von Neumann. Tali approcci erano basati sulla teoria astratta degli operatori su spazi di Hilbert.

3. Alcuni esempi esattamente risolubili

In questo paragrafo affronteremo l'analisi dell'equazione di Schrödinger per alcuni semplici sistemi fisici per cui il problema dinamico può essere esattamente risolto. Così come in Meccanica Classica sono pochi i sistemi che è possibile ridurre alle quadrature (si risolvono le equazioni del moto esplicitamente, modulo il calcolo di integrali indefiniti), così anche in Meccanica Quantistica (e ciò non è certo sorprendente) il problema dinamico relativo alle equazioni del moto si sa risolvere molto raramente. Vogliamo analizzare un paio di casi in cui ciò è possibile.

Oscillatore Armonico

Consideriamo l'Hamiltoniana Classica relativa ad un oscillatore armonico di massa e di costante di richiamo unitaria:

$$H(p, q) = \frac{1}{2}(p^2 + x^2). \quad (3.1)$$

Le regole di quantizzazione discusse sopra ci portano a definire l'operatore:

$$H = \frac{1}{2}(P^2 + X^2) = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + \frac{1}{2}X^2. \quad (3.2)$$

H è da intendersi come operatore su $L_2(\mathbb{R})$ con dominio di definizione $D(H) = \mathcal{S}$.

Sulla base di quanto detto alla fine del precedente paragrafo, ci aspettiamo che l'oscillatore armonico quantistico possieda una famiglia completa di autovalori e autostati corrispondenti. Così è. Tali oggetti possono essere determinati esplicitamente.

Definiamo a tal fine gli operatori:

$$b = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(X + iP); \quad b^* = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(X - iP) \quad (3.3)$$

entrambi definiti su $D(H)$.

Usando le regole di commutazione canoniche, è immediato verificare che:

$$H = \hbar(b^*b + \frac{1}{2}). \quad (3.4)$$

Si noti che valgono le seguenti regole di commutazione:

$$[b, b^*] = I. \quad (3.5)$$

Si consideri ora la funzione:

$$e_0(x) = (\pi\hbar)^{(-1/4)} e^{-\frac{x^2}{2\hbar}}. \quad (3.6)$$

Risulta $\|e_0\| = 1$. Inoltre $be_0 = 0$. Si osservi inoltre che:

$$\begin{aligned} ((b^*)^j e_0, (b^*)^k e_0) &= (b(b^*)^j e_0, (b^*)^{k-1} e_0) = ([b, (b^*)^j] e_0, (b^*)^{k-1} e_0) = \\ &= j((b^*)^{j-1} e_0, (b^*)^{k-1} e_0) = j! \delta_{j,k} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Definendo ora:

$$e_j(x) = \frac{(b^*)^j e_0(x)}{\|(b^*)^j e_0\|}, \quad (3.8)$$

si ha, dalla (3.7), che $\{e_j\}$ formano una famiglia ortonormale.

Le $\{e_j\}$ si chiamano funzioni di Hermite e, in realta, si vede facilmente che formano una base completa. Infatti e_j , la funzione di Hermite di ordine j , é un polinomio di grado j per una Gaussiana.

E' interessante l'azione degli operatori b e b^* su questa base. Poiché dalla (3.7) $\|(b^*)^j e_0\|^2 = j!$, risulta:

$$b^* e_j = (j+1)^{1/2} e_{j+1} \quad (3.9)$$

$$b e_j = j^{1/2} e_{j-1} \quad (3.10)$$

A causa delle (3.9) e (3.10) gli operatori b e b^* vengono detti operatori di distruzione e creazione rispettivamente.

La base costituita dalle funzioni di Hermite rende anche diagonale l'operatore H . Infatti si ha:

$$H e_j = \hbar b^* b e_j + \frac{\hbar}{2} e_j = \hbar(j + \frac{1}{2}) e_j. \quad (3.11)$$

Gli autovalori dell'oscillatore armonico sono dunque $\hbar/2, (3/2)\hbar, (5/2)\hbar, \dots$. Le autofunzioni sono le funzioni di Hermite $e_0, e_1, \dots$. Con ciò il problema stazionario é completamente risolto.

La particella libera

Si consideri una particella libera di massa unitaria in $\mathbb{R}^n$, $n = 1, 2, 3$.

L'Hamiltoniana é data da:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta, \quad (3.12)$$

e l'equazione di Schrödinger si scrive:

$$i\partial_t\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta\psi(x,t). \quad (3.13)$$

Se ψ_0 é il dato iniziale della (2.13), procedendo come per l'equazione del calore nello spazio, si arriva alla soluzione esplicita:

$$\psi(x,t) = \int_{\mathbb{R}^n} dy G_0(x-y)\psi_0(y) \quad (3.14)$$

dove

$$G_0(x) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{n/2} e^{i\frac{m|x|^2}{2\hbar t}} \quad (3.15)$$

é la funzione di Green del problema.

Barriera di potenziale

Si consideri una particella unidimensionale quantistica di massa unitaria su cui agisce un potenziale V descritto da una funzione a gradino:

$$V(x) = 0 \quad x < 0, \quad V(x) = V \quad x \geq 0. \quad (3.16)$$

In questo caso il potenziale non é confinante e non ci aspettiamo di avere stati legati. Tuttavia impostiamo ugualmente l'equazione agli autovalori:

$$H\psi = E\psi, \quad (3.17)$$

che, dopo aver posto per comodità $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$, diviene:

$$-\psi'' + (V - E)\psi = 0. \quad (3.18)$$

Avbbiamo due casi che tratteremo separatamente. Caso $E > V$.

In questo caso, per $x \neq 0$ si ha

$$\psi(x) = A_- e^{i\sqrt{E}x} + B_- e^{-i\sqrt{E}x} \quad x < 0, \quad (3.19)$$

$$\psi(x) = A_+ e^{i\sqrt{E-V}x} + B_+ e^{-i\sqrt{E-V}x} \quad x > 0, \quad (3.20)$$

dove A_- , A_+ , B_- , B_+ sono 4 costanti da determinare. Si osservi che due condizioni sono garantite dalla continuità di ψ e di ψ' . Inoltre siccome l'equazione é omogenea, essa non può che essere risolta a meno di una

costante moltiplicativa che fissiamo imponendo $A_- = 1$. Ipotizziamo, per il momento, anche la condizione $B_+ = 0$. Allora:

$$\psi(x) = e^{i\sqrt{E}x} + B_- e^{-i\sqrt{E}x} \quad x < 0, \quad (3.21)$$

$$\psi(x) = A_+ e^{i\sqrt{E-V}x} \quad x > 0, \quad (3.22)$$

Dalla continuit  di ψ e ψ' in 0, abbiamo:

$$1 + B_- = A_+; \quad i\sqrt{E}(1 - B_-) = i\sqrt{E-V}A_+ \quad (3.23)$$

da cui ricaviamo facilmente:

$$A_+ = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E-V}}; \quad B_- = \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E-V}}{\sqrt{E} + \sqrt{E-V}} \quad (3.24)$$

Si osservi che tale soluzione descrive un'onda piana viaggiante da sinistra, di ampiezza 1, che interagisce con la barriera di potenziale. Parte di questa onda   trasmessa e dunque, per $x > 0$, abbiamo un'onda viaggiante verso destra con ampiezza A_+ . Parte viene riflessa. Questa   la componente a $x < 0$ con ampiezza B_- . L'onda riflessa viaggia con velocit  negativa. Analogamente avremmo potuto cercare una soluzione del tipo:

$$\psi(x) = B_- e^{-i\sqrt{E}x} \quad x < 0, \quad (3.25)$$

$$\psi(x) = A_+ e^{i\sqrt{E-V}x} + e^{-i\sqrt{E-V}x} \quad x > 0, \quad (3.26)$$

situazione simmetrica a quella precedentemente descritta, in cui 1 e A_+ sono le ampiezze dell'onda incidente da sinistra e dell'onda riflessa. Mentre B_-   l'ampiezza dell'onda trasmessa (verso sinistra). La corrente di massa   stata precedentemente definita come $J = \mathcal{I}(\bar{\psi}\psi')$. Nella situazione (3.21),(3.22) siano J_i, J_t, J_r le correnti relative all'onda incidente, trasmessa e riflessa rispettivamente. Si ha:

$$J_i = \sqrt{E}, \quad J_r = -|B_-|^2\sqrt{E}, \quad J_t = |A_+|^2\sqrt{E-V} \quad (3.27)$$

da cui si ottiene facilmente la seguente relazione che esprime la conservazione della corrente:

$$J_i = J_t - J_r. \quad (3.28)$$

Una relazione analoga si ottiene, naturalmente, per la situazione descritta dalle (3.25) e (3.26).

Caso $E < V$.

In questo caso abbiamo:

$$\psi(x) = A_- e^{i\sqrt{E}x} + B_- e^{-i\sqrt{E}x} \quad x < 0, \quad (3.29)$$

$$\psi(x) = A_+ e^{\sqrt{V-E}x} + B_+ e^{-\sqrt{V-E}x} \quad x > 0. \quad (3.30)$$

Procedendo come sopra, si determinano i coefficienti. In questo caso però, abbiamo un termine esponenzialmente crescente per $x \rightarrow \infty$. Questa crescita non é fisicamente accettabile per cui si pone $A_+ = 0$. Procedendo come prima, poniamo $A_- = 1$. Pertanto:

$$\psi(x) = e^{i\sqrt{E}x} + B_- e^{-i\sqrt{E}x} \quad x < 0, \quad (3.31)$$

$$\psi(x) = B_+ e^{-\sqrt{V-E}x} \quad x > 0. \quad (3.32)$$

Imponendo la continuità della ψ e della sua derivata in 0, otteniamo facilmente:

$$B_+ = \frac{2i\sqrt{E}}{i\sqrt{E} + \sqrt{V-E}}; \quad B_- = \frac{i\sqrt{E} + \sqrt{V-E}}{i\sqrt{E} - \sqrt{V-E}} \quad (3.33)$$

In questo caso la corrente di massa é nulla. Infatti si trova che $J_i = -J_r, J_t = 0$. Infatti, poiché l'energia dell'onda incidente é piú piccola della barriera, non si ha flusso di massa attraverso l'origine. Tuttavia la probabilità di trovare la particella oltre la barriera (per $x > 0$) non é nulla. Essa decresce esponenzialmente a misura che ci si allontana dall'origine. In contrasto con la fisica classica per cui una particella non può superare barriere di potenziale piú alte della sua energia, in Meccanica Quantistica ciò può accadere, con una certa probabilità. Tale effetto viene suggestivamente denominato "effetto tunnel".

Si noti infine, che non abbiamo risolto il problema agli autovalori perché le autofunzioni trovate non sono normalizzate. I valori dell'energia ammessi non sono quantizzati (ogni valore E é ammesso in quest'analisi) e la particella non é descritta da stati legati. Autofunzioni anomale di questo tipo vengono chiamate autofunzioni generalizzate e intervengono nella teoria della diffusione (scattering). Si osservi tuttavia che, analogamente al caso di un genuino problema agli autovalori, é ugualmente possibile risolvere il problema dinamico relativo all'equazione di Schrödinger dipendente dal

tempo. Infatti, denotando con ψ_E la soluzione del problema (3.21), (3.22), se il dato iniziale é esprimibile da una relazione del tipo:

$$\psi_0(x) = \int dE \psi_E(x) \varphi(E), \quad (3.34)$$

cioé per mezzo di una sovrapposizione di onde incidenti da sinistra, allora l'evoluzione temporale é subito espressa dall'integrale:

$$\psi(x, t) = \int dE \psi_E(x) e^{-iEt} \varphi(E). \quad (3.35)$$

Si noti l'analogia con il problema della particella libera in cui si espande il dato iniziale in termini di una sovrapposizione di onde piane $e^{\pm i\sqrt{E}x}$ per mezzo della trasformata di Fourier.

Vi sono dei casi che possono essere trattati analogamente alla barriera di potenziale, ad esempio quando il potenziale é diverso da zero e costante in un intervallo finito. Si determinino, per esercizio, le autofunzioni generalizzate del problema

$$-\psi'' + (V(x) - E)\psi = 0,$$

in questo caso.

Vi é un importantissimo esempio di sistema esattamente risolubile che non trattiamo per agioni di brevità: l'atomo di idrogeno. Il lettore interessato puó consultare il libro di Landau. Si puó infatti risolvere esattamente, per separazione di variabili, l'equazione di Schrödinger stazionariae e calcolare i livelli di energia dell'atomo di idrogeno. Questo é forse il piú grande successo della teoria. Possiamo dire che, come nel caso della Meccanica Classica la legittimazione della teoria viene dalla capacità di dimostrare le leggi di Keplero, la validità e l'utilità della Meccanica Quantistica viene messa in luce dalla sua capacità di calcolare i livelli di energia dell'atomo di idrogeno.